

## ランダムスピン系の磁氣的性質に関する研究

著者	藤木 澄義
号	894
発行年	1981
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10097/9630">http://hdl.handle.net/10097/9630</a>

氏 名	ふじ 藤 木 すみ よし 澄 義
授 与 学 位	工 学 博 士
学 位 授 与 年 月 日	昭 和 57 年 3 月 25 日
学位授与の根拠法規	学位規則第 5 条第 1 項
研究科，専攻の名称	東北大学大学院工学研究科 ( 博士課程 ) 応用物理学専攻
学 位 論 文 題 目	ランダムスピン系の磁氣的性質に関する研究
指 導 教 官	東北大学教授 桂 重俊
論 文 審 査 委 員	東北大学教授 桂 重俊      東北大学教授 高橋 実 東北大学教授 滝本 昇      東北大学教授 広池 和夫

## 論 文 内 容 要 旨

### 第 1 章 序 論

ランダムスピン系のモデルが適用される物質として，種々のタイプのものが考えられる。中でも実験と理論の両面より興味深さかんに研究されてきた系として  $\text{Au}_{1-x}\text{Fe}_x$  等のスピングラスを呈する物質と， $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$  等のインバー磁性合金がある。スピングラスとはいかなる周期性も持たずに空間的にはランダムな方向を向きながら，個々のスピンは秩序状態にある相を言い，強磁性的な相互作用と反強磁性的な相互作用がランダムに分布した系等において見出される。また，インバー合金の示す磁氣的異常性と熱膨張の異常性は，強磁性的な秩序状態内の部分的な反強磁性的スピン配列によって引き起こされると考えられる。これらの系を理論的に考察するには従来の規則系に対して用いられてきた手法をそのまま適用することはできず，系の持つランダム性をうまく取り込む近似法が必要となる。

本研究はランダムスピン系に対する従来の理論的研究をより発展させ，スピングラスとインバー合金において不明確であった種々の問題点を，ランダムスピン系に対する統計力学的手法を用いて考察したものである。

### 第 2 章 ランダムスピン系に対するクラスター近似

ランダムスピン系に対して Bethe 近似は従来からよく用いられてきたが，その定式化はあまり明

確に行なわれていなかった。そこで  $(Z+1)$  体のクラスターを用いた Bethe 近似のランダム系に対する拡張を行ない、磁化と有効場に対する基本式を導びいた。また、閉じたループの効果を直接的に取り込むことのできる四角形近似をクラスター近似に基づいてランダム系へ拡張し、その定式化を行なった。結果として、ランダムスピンの自由エネルギーの表式を得、その自由エネルギーに対する変分原理に基づいてクラスターの密度行列に対する関係式を導びいた。

### 第3章 スピングラスの非線型帯磁率 $\chi_2$

スピングラス転移を特徴づけることのできる巨視的物理量として、非線型帯磁率  $\chi_2$  の振舞が注目されているが、他のタイプの相転移点近傍における  $\chi_2$  の振舞いと比較した体系的な研究は行なわれていなかった。そこで a) 純粋な強磁性体、b) 純粋な反強磁性体、c) フラストレーションを持たないランダムスピン系である Mattis モデル、及び d) フラストレーションを内包したランダムスピン系として、強磁性的相互作用と反強磁性的相互作用がランダムに分布したランダムボンドモデル、の四種の系にお

けるその転位温度近傍での  $\chi_2$  の振舞を Bethe 近似によって求めて比較した(図1)。結果としてスピングラス転移はその転移温度の両側における  $\chi_2$  の負の発散によって特徴づけられ、他のタイプの相転移と区別できることがわかった。  
 $\text{Pt}_{1-x}\text{Mn}_x(\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x)_2\text{O}_3$   
 等において観測されている  $\chi_2$  の負の発散はスピングラス転移を特徴づけているものとして理解できる。

### 第4章 d次元超立方格子上のスピングラス

スピングラスが示す種々の物理的性質において、閉じたループが演じるフラストレーションの効果が重要であることが指摘されてき

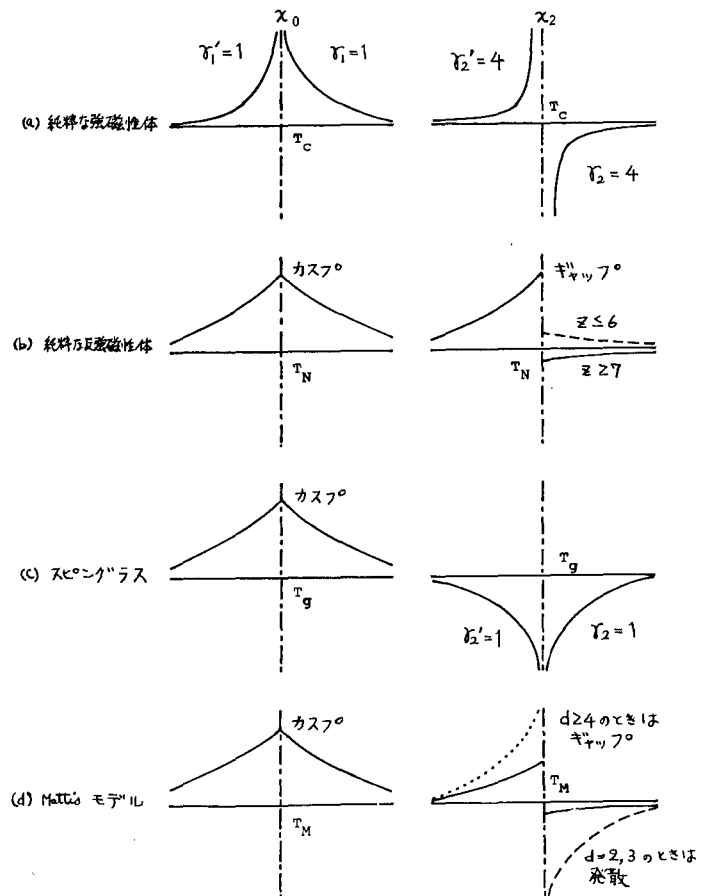


図1 種々の系の転移温度近傍における線型帯磁率  $\chi_0$  と非線型帯磁率  $\chi_2$  の振舞。

た。しかし従来の研究においてフラストレーションの効果を直接的に取り込んだ取り扱いはなされていなかった。そこでフラストレーションの効果を直接取り込むことのできるように、第2章においてランダム系に拡張された四角形近似を用いて、 $d$ 次元超立方格子上的スピングラス転移温度を求めた(図2に2次元の場合の相図を示す)。結果として、格子の次元が低い程フラストレーションを直接取り込んだことによる影響が大きくみられ、得られたスピングラス転移温度は従来のBethe近似等によって得られたものに比べて大きく降下する。その降下の度合は、スピングラス相が二次元や三次元においても少なくとも準安定状態として存在するであろうことを示唆している。

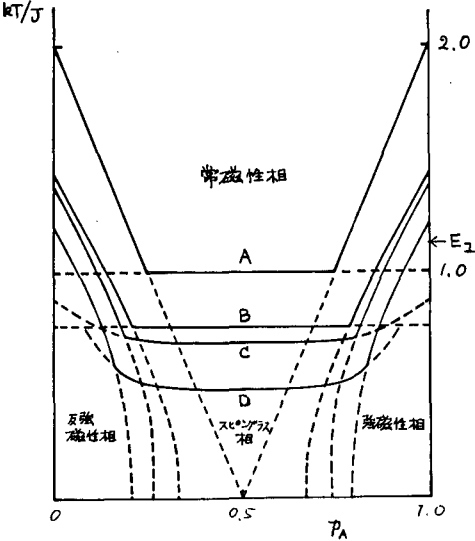


図2 種々のクラスター近似による相図の比較( $d=2$ の場合)  
A:分子場近似                      B: Bethe 近似  
C:単純四角形近似(第4章 § 5)  
D:四角形近似(第4章 § 6)     $E_1$ : 高温展開

### 第5章 クラスター近似の拡張

スピングラスの安定性に対して、フラストレートしたセルの配列に起因する基底状態の縮退の効果の重要性は、二、三の研究によって指摘されてきたが、統計力学的に調べられたものはなかった。そこで立方体を含むフラストレーションによって誘起される基底状態の縮退の効果を実際に取り込めるように立方体近似をランダム系へ拡張し、スピングラス転移温度を求めた。その際、立方体クラスターの密度行列の部分トレースを求める必要が生じる。一般に $N$ 個の格子点から構成されるクラスターの密度行列のトレースを求める計算手順は $2^N$ に比例し、クラスターを大きくするにつれて計算の遂行は加速度的に困難となる。この困難は数式処理システム REDUCE を用いる手法を開発することによって回避され、単純立方格子の立方体近似によるスピングラス転移温度が求められた。得られた転移温度を従来の近似法によるものと比較することにより、立方体を含むフラストレーションによって誘起される基底状態の縮退の効果の影響がわかる(表1)。結果は単純立

表1 種々のクラスター近似によって得られた  $p = 1$  におけるキュリー温度  $T_c$  と  $p = 0.5$  におけるスピングラス転移温度  $T_g$ 。

近 似 レ ベ ル				$KT_c / J (p = 1)$	$KT_g / J (p = 0.5)$
分	子	場	近 似	3.0	1.2247
B	e	t	h	2.4663	1.0390
単	純	四	角 形 近 似 (第4章 § 5 の 結 果)	2.4464	1.0165
( 単 純 )	立	方	体 近 似 (第5章 の 結 果)	2.4198	0.9850
四	角	形	近 似 (第4章 § 6 の 結 果)	2.3049	0.8263
立	方	体	近 似 (kikuchi の 第 三 近 似)	2.2905	.....
高	温	展	開	2.2552	0.0

方格子におけるスピングラスの安定性を示唆しており、第4章の結論を裏付けている。

## 第6章 面心立方格子の第2種反強磁性相とスピングラス相

スピングラス相の出現には強磁性的な相互作用と反強磁性的な相互作用との拮抗が必ずしも必要な条件ではなく、系が何らかのランダム性とフラストレーションとを持つとき、適当な条件の下でスピングラス相が出現することが指摘されている。しかしその示された例は少なく、理論と実験との比較を行なったものも少ない。そこで構造的にフラストレーションを内包した反強磁性的面心立方格子上の磁性原子を非磁性原子によってランダムに希釈することにより出現する相を調べた。第1隣接相互作用  $J$  と第2隣接相互作用  $J'$  が  $J' < 0$ ,  $|J'| > |J|$  のとき面心立方格子上に第2種の反強磁性相とスピングラス相が出現し(図3) 得られた相図は  $\text{Mn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  の実験結果と定性的に一致する。この物質は Mn 間の相互作用が上記の条件を満足して、非磁性原子 Cd がランダムに分布しているものとして理解される。

## 第7章 インバー合金の磁気体積効果

インバー合金  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$  の示す磁氣的異常性は強磁性的な秩序状態における局所的な反強磁性的スピン配列によって引き起こされていることが指摘されている。これは Ni-Ni 間, Ni-Fe 間の相互作用が強磁性的であるのに対し, Fe-Fe 間の相互作用が反強磁性的であると考えることによって説明することができる。さらに各相互作用の体積依存性を考慮することによって磁氣的な自由エネルギーが体積に依存し、熱膨張率の異常等の磁気体積効果が生じると考えられるが、この機構は明らかにされていなかった。そこで面心立方格子に2種類の原子がランダムに分布した系を四面体近似によって取り扱い、磁氣的自由エネルギーを求め、系の持つ磁氣的異常性と磁気体積効果を考察した。相互作用が  $J_{\text{NiNi}} > 0$ ,  $J_{\text{NiFe}} > 0$ ,  $J_{\text{FeFe}} < 0$  で、その体積による微分係数  $\epsilon$  が  $\epsilon_{\text{NiNi}} < 0$ ,  $\epsilon_{\text{FeFe}} > 0$ ,  $\epsilon_{\text{FeFe}} > 0$ , かつ  $\epsilon_{\text{FeFe}} \gg |\epsilon_{\text{NiNi}}|, |\epsilon_{\text{NiFe}}|$  の特徴を持つとき  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$  合金の示す異常性がよく説明できることを示した。(図4, 図5, 図6)

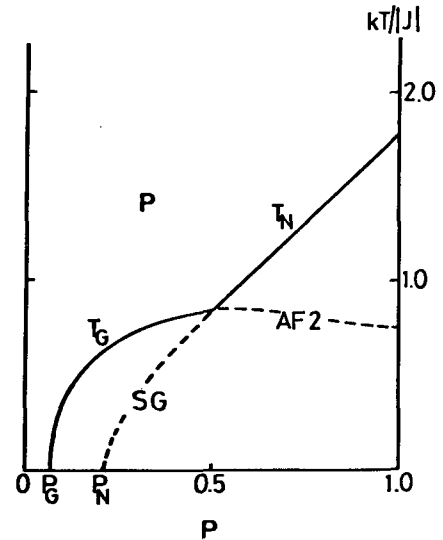


図3 反強磁性的面心立方格子の非磁性原子での希釈による第2種反強磁性相(AF2)とスピングラス相(SG)と常磁性相(P)。第1隣接相互作用  $J < 0$ , 第2隣接相互作用  $J' < 0$ ,  $J'/J = 10/9$  の場合。

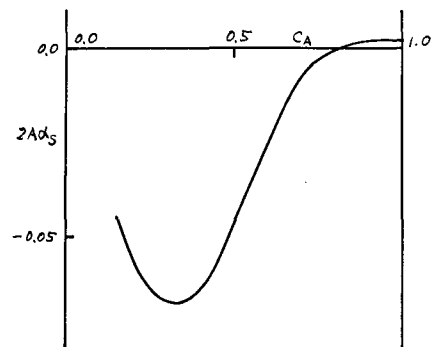


図4 熱膨張率の磁氣的異常部分  $\alpha_s$  の A 原子濃度  $C_A$  依存性。

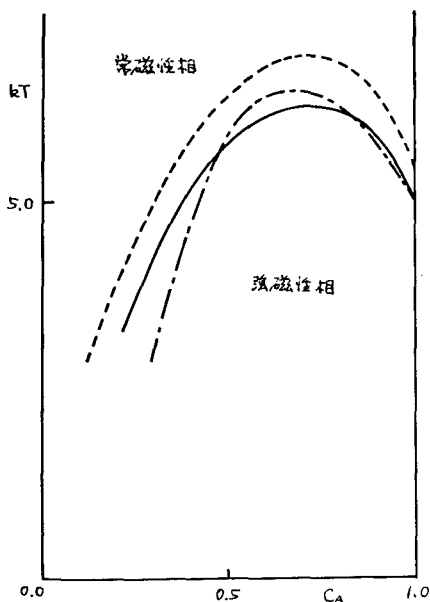


図5 キュリー温度  $T_c$  の A 原子濃度  $C_A$  依存性。

- : モンテカルロシミュレーション (第 8 章)
- : 四面体近似 (第 7 章)
- · - :  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$  の実験事実

## 第 8 章 ランダム磁性体のモンテカルロシミュレーション

ランダムスピン系の磁氣的性質を調べる有効な手法の 1 つにモンテカルロシミュレーションがある。

第 2 章から第 7 章までに用いたクラスター近似のランダムスピン系における妥当性の検査と得られた結果の裏付けを行なう意味から、ここで第 7 章において扱った面心立方格子上のランダムサイトモデルをモンテカルロシミュレーションによって調べた。計算機実験で扱うことのできる有限の大きさを持ったサンプル内に 2 種類の原子をランダムに配置させたとき、サンプルのサイズが小さい程種々の原子配列によるサンプルごとに得られるデータのバラツキは大きくなる。そこで有限のサイズを持ったサンプル内に、無限の多様性を持った原子配列をよく実現している原子配列を選び出すための評価関数を作製することにより、サンプルごとのバラツキが少ないデータを得ることができるようになった。平均磁化・エネルギー・比熱・帯磁率の熱平均値を計算することにより、キュリー温度と飽和磁化の組成依存性が得られた。モンテカルロシミュレーションによって得られた結果は第 7 章によって用いた四面体近似によるものとよく一致し、 $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$  合金の磁氣的異

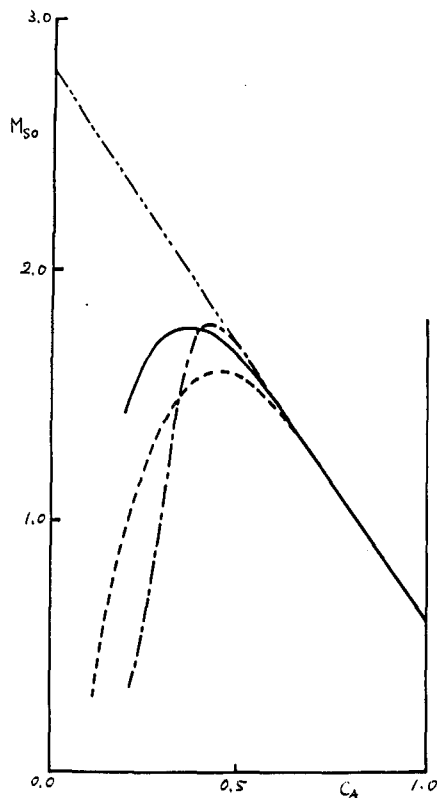


図 6 飽和磁化  $M_{so}$  の A 原子濃度  $C_A$  依存性。

- : モンテカルロシミュレーション (第 8 章)
- : 四面体近似 (第 7 章)
- · - :  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$  の実験事実

常性をよく説明するものである。

## 第9章 総 括

本研究によって得られた結果を要約する。

1) 非線型常磁率  $\chi_2$  がスピングラス転移温度  $T_g$  の両側において負に発散し、この特徴によって他のタイプの相転移とスピングラス転移とを区別することができることを明らかにした。

2) ランダムスピソ系において、閉じたループが演じるフラストレーションの効果がスピングラス転位温度の低下に及ぼす影響は、格子の次元が低い程大きい事を定量的に明らかにした。

3) 構造的にフラストレーションを内包する系を非磁性原子によってランダムに希釈することにより、面心立方格子において第2種の反強磁性相とスピングラス相が出現することを明らかにし、 $Mn_x Cd_{1-x} Te$  の相図を説明できた。

4) インバー合金  $Fe_{1-x}Ni_x$  において、Fe-Fe間の相互作用が反強磁性的で、Fe-Ni, Ni-Ni間の相互作用が強磁性的であり、Fe-Fe間の相互作用の体積依存性がFe-Ni間, Ni-Ni間のそれよりも大きいと考えることにより、 $Fe_{1-x}Ni_x$ 合金の示す磁氣的異常性及び磁気体積効果がよく説明されることを明らかにした。

## 審 査 結 果 の 要 旨

ランダムなスピンはスピングラスやインバー合金等の興味ある物理特性と関連して大きな問題となっている。本論文はランダムなイジングモデルを扱う一般的方法を展開して確立し、これ等の問題に応用してその磁気構造を明らかにしたものである。

第1章は序論であり、従来の理論と実験についての概観を与えている。

第2章ではクラスター近似法のランダムスピン系に対する一般的拡張を行ない、ベータ近似、四角形近似による定式化を行った。

第3章では強磁性体、反強磁性体、マチスモデル、スピングラス、のそれぞれの転移点付近の非線型帯磁率  $\chi_2$  の振舞をしらべ、転移点の高温側、低温側における  $\chi_2$  の負の発散がスピングラスを特徴づけることを明らかにした。

第4章ではベータ近似を一步進めた四角形近似を展開して、d次元超立方格子に適用している。ここでスピングラス転移温度は次元数が少い程近似をあげると降下することを示した。これはフラストレーションの効果が、次元の少い程大きいことを明らかにしたものである。

クラスター近似の方法では、クラスターを少し大きくすると計算式が加速度的に膨大となり、四角形以上の大きなクラスターを扱うことは不可能であった。第5章では数式処理システムREDUCEによる、密度行列の部分トレースをとる方法を案出することにより、この困難を打開した。これにより単純立方格子の立方体クラスター近似におけるスピングラス転移温度を求めた。

第6章においては面心立方格子の第2種反強磁性相とスピングラス相を考慮した四角形近似を用い、その転移温度を求めた。この結果により  $\text{Mn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  の相図を定性的に説明することが出来た。

第7章においては面心立方格子上のランダムサイト系として、 $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}$  合金の磁氣的異常性および熱膨張の異常性を扱った。ベータスレーター曲線による交換相互作用の体積依存性を用いることにより、磁氣的自由エネルギーの体積依存性を導き、これによりインバー合金の磁氣的体積効果が導かれることを示した。

第8章においてはモンテカルロシミュレーションにより、 $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}$  合金をランダムサイト系として扱い、その磁氣的性質をしらべ、平均磁化、エネルギー、比熱の温度依存性、磁氣的異常性を説明し、前章の方法の妥当性の基礎付けを行った。

第9章は総括である。

以上要するに、本論文はランダムスピン系の磁氣的性質について、クラスター近似法という統計力学的手法を展開し、スピングラスおよびインバー合金の物理的特性を明らかにしたもので、応用物理学に寄与するところ少なくない。

よって、本論文は工学博士の学位論文として合格と認める。